

ности, определенный интерес представляли модели с изменяемой системой атомных радиусов в зависимости от атомного окружения в молекуле, как это было сделано в модели DENSON [1]. Дальнейшее развитие этого подхода привело к модели ANSAB [2], где атомная сфера деформировалась в направлении атом-атомных взаимодействий. В результате соединение приобрело новую молекулярную форму. Подготовленная на языке СИ++ вычислительная программа позволяет получить наглядные представления о новом образе рассматриваемой молекулы. Как и ранее, критерием достоверности оценки молекулярной формы соединения через его объем служило удовлетворительное согласие расчетной и экспериментальной плотности соответствующего вещества. В настоящей работе рассмотрена применимость данного алгоритма к спиросочлененным циклическим углеводородам. В таблице приведены некоторые наиболее типичные результаты расчетов. Анализ данных показывает возможность применения новой модели для оценки соответствующих характеристик соединений данного класса.

№	Соединение	d_{4}^{20} (эксп.)	d_{4}^{20} (расч.)
1	Спиро [2.2] пентан	0.7572	0,7596
2	Циклопропилспиропентан	0.8395	0,7629
3	1-метилспиро [2.4]гептадиен-4.6	0.8646	0,7881
4	1,2-диметил-спиро[2,4]-гептадиен-4,6	0.8662	0,7845
5	N-карбозтокиспиро [2,4]-гексан	0.9192	0,9061

1. Белик А.В., Ульянова Л.В., Зефилов Н.С. Простая модель связи между молекулярной структурой и плотностью вещества // Докл. АН СССР.1990. Т.313, вып.3.С.628-629.
2. Рукавишников В.В., Белик А.В. Новый алгоритм пространственного представления и расчета объема органических соединений // Вестн. Челяб. ун-та. Сер. 4. Химия. 2004. №1. С. 44-45.

СИНТЕЗ ЦИКЛОГЕКСИЛЗАМЕЩЕННЫХ МОНО- И ПОЛИМЕТИЛБЕНЗОЛОВ

Кратирова Д.Д., Курганова Е.А., Балукова А.А.

Ярославский государственный технический университет

Циклогексилбензол (ЦГБ) и его метильные производные являются потенциальными источниками для получения нафтеновых кислот, бифенил- и 9-оксофлуоренкарбоновых кислот. В этой связи разработка экологически чистых, базирующихся на доступном нефтехимическом сырье методов получения ЦГБ и его метильных производных является актуальной задачей.

Ранее нами было показано, что ЦГБ может быть получен путем гидромержизации бензола. Однако, синтезировать метильные производные ЦГБ гидромержизацией метилбензолов с высоким выходом целевых продуктов не удастся ввиду крайне низкой селективности процесса и образования большого количества изомеров. Реальным методом получения метилзамещенных ЦГБ оказался процесс алкилирования метилбензолов циклогексанолом. Циклогексанол, как известно, является крупнотоннажным продуктом органического синтеза, производство которого в России составляет сотни тонн в год.

Проведены систематические исследования реакции циклоалкилирования метилбензолов циклогексанолом. Использован широкий круг метилбензолов: толуол, этил-, изопропилбензол, *о*-, *м*-, *п*-ксилол, мезитилен, тетраметилбензол. Рекомендованы условия осуществления реакции: молярное соотношение исходный ароматический углеводород : циклогексанол : серная кислота 3 : 1 : 3, температура реакции 0–20 °С, время реакции 3 часа – позволяющие достигать полную конверсию циклогексанола и выход циклогексильных производных до 96 %. Доказано, что реакции циклоалкилирования ароматических углеводородов протекают по механизму кислотного гомогенного катализа

СИНТЕЗ И ИОДЦИКЛИЗАЦИЯ 1-МЕТИЛ-2-АЛЛИЛТИОИМИДАЗОЛА

Субботина С.В., Ким Д.Г.

Челябинский государственный университет

Реакцией 1-метил-2-меркаптоимидазола (1) с бромистым аллилом в присутствии щелочи в ацетоне синтезирован 1-метил-2-аллилтиоимидазол (2), который представляет собой светло-желтую жидкость, растворимую в ацетоне, хлороформе, дихлорметане. Соединение 2 исследовано методом хромато-масс-спектрометрии. Время удерживания составляет 4,04 мин. В масс-спектре имеется пик молекулярного иона (M 154), пик с m/z 139 $[M-CH_3]^+$, который является самым интенсивным пиком, пик с m/z 121, обусловленный отщеплением аллильного радикала.

При проведении реакции соединения 1 с бромистым аллилом в ацетоне в отсутствие щелочи образуется гидробромид 1-метил-2-аллилтиоимидазола (3), который представляет собой белое кристаллическое вещество, нерастворимое в ацетоне. Его структура подтверждается тем, что при взаимодействии вещества 3 с водным раствором щелочи образуется аллилсульфид 2.